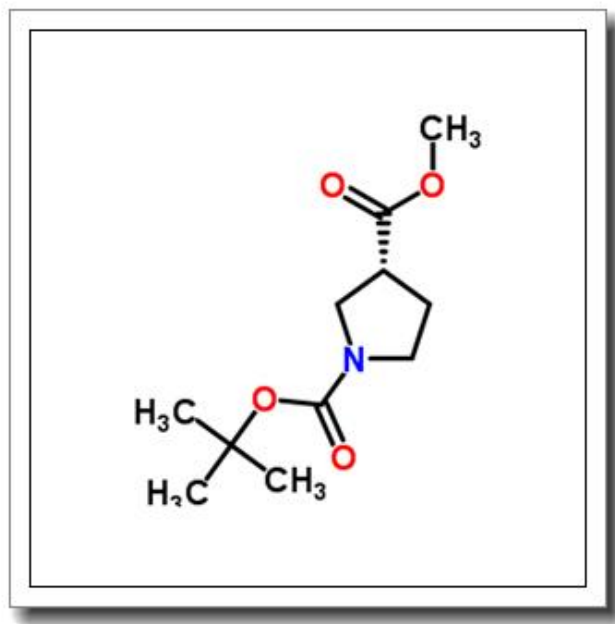


(R)-1-Boc-3-羧基吡咯烷甲酯

(R)-1-tert-Butyl 3-methyl pyrrolidine-1,3-dicarboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	(R)-1-tert-Butyl 3-methyl pyrrolidine-1,3-dicarboxylate
中文名称	(R)-1-Boc-3-羧基吡咯烷甲酯
CAS 号	441717-40-4
分子式	C ₁₁ H ₁₉ N ₀₄
分子量	229.273
纯度	≥96%

产品说明

(R)-1-叔丁基-3-甲基吡咯烷-1,3-二甲酸酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(R)-1-tert-Butyl 3-methyl pyrrolidine-1,3-dicarboxylate, 中文别名(R)-1-Boc-3-羧基吡咯烷甲酯, CAS 号 441717-40-4。其分子式为 C₁₁H₁₉N₀₄, 分子量 229.273, 是一种高纯度 (≥96%) 的手性吡咯烷衍生物。该化合物为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 具有 Boc 保护基团和酯基官能团, 在有机溶剂如二氯甲烷、甲醇中具有良好的溶解性。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性砌块, (R)-构型赋予该分子在不对称合成中的关键作用。Boc 保护基可选择性脱除, 为后续氨基官能团的修饰提供便利。其结构中的酯基和吡咯烷环系是构建生物活性分子 (如药物中间体、蛋白酶抑制剂) 的重要骨架, 尤其在神经递质类似物和抗病毒药物研发中具有显著价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药和有机合成领域。具体用途包括:

- 手性药物合成: 作为 HIV 蛋白酶抑制剂、镇痛剂等药物的关键中间体
- 不对称催化: 用于构建含吡咯烷结构的手性催化剂配体
- 肽类修饰: 通过 Boc 保护/脱保护策略参与固相肽合成
- 生物标记物开发: 作为荧光探针或同位素标记的前体化合物

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 至 4° C 的惰性气体 (如氩气) 环境下避光保存, 开封后需充氮密封。使用前需恢复至室温并充分干燥, 避免接触水分以防 Boc 基团水解。推荐在通风橱中操作, 溶解时优先选用无水级溶剂。长期储存建议分装以避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证结构。安全数据表明:

- 安全警示: 可能引起皮肤/眼睛刺激, 操作时需佩戴防护手套和护目镜
- 应急处理: 接触皮肤后立即用肥皂水冲洗, 吸入时转移至空气新鲜处
- 废弃处置: 按危险化学品规范处理, 不可直接排入下水道
- 运输分类: 非危险品, 但建议作为化学品特殊运输

注: 具体实验方案需结合目标反应体系优化, 建议参考文献或咨询专业技术支持。